```
data_lach3

_audit_creation_method            SHELXL-97
_chemical_name_systematic
;
 ?
;
_chemical_name_common             (NBu4)2(NEt4)H[SiW10O36
(H2C=CHCH2PO)2]
_chemical_melting_point           ?
_chemical_formula_moiety          ?
_chemical_formula_sum
 'C46 H103 N3 O38 P2 Si W10'
_chemical_formula_weight          3234.84

loop_
 _atom_type_symbol
 _atom_type_description
 _atom_type_scat_dispersion_real
 _atom_type_scat_dispersion_imag
 _atom_type_scat_source
 'C'  'C'   0.0033   0.0016
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'H'  'H'   0.0000   0.0000
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'N'  'N'   0.0061   0.0033
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'O'  'O'   0.0106   0.0060
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'Si'  'Si'   0.0817   0.0704
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'W'  'W'  -0.8490   6.8722
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'P'  'P'   0.1023   0.0942
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'

_symmetry_cell_setting            Monoclinic
_symmetry_space_group_name_H-M    'Cc'

loop_
 _symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'
 'x, -y, z+1/2'
 'x+1/2, y+1/2, z'
 'x+1/2, -y+1/2, z+1/2'

_cell_length_a                    18.7759(16)
_cell_length_b                    24.639(2)
_cell_length_c                    17.1317(15)
_cell_angle_alpha                 90.00
_cell_angle_beta                  106.4060(10)
_cell_angle_gamma                 90.00
_cell_volume                      7602.9(11)
_cell_formula_units_Z             4
_cell_measurement_temperature     200(2)
_cell_measurement_reflns_used     24702
_cell_measurement_theta_min       1.3
_cell_measurement_theta_max       30.9

_exptl_crystal_description        ?
_exptl_crystal_colour             Colourless
_exptl_crystal_size_max           ?
_exptl_crystal_size_mid           ?
_exptl_crystal_size_min           ?
_exptl_crystal_density_meas       ?
```

```
_exptl_crystal_density_diffrn     2.826
_exptl_crystal_density_method     'not measured'
_exptl_crystal_F_000              5952
_exptl_absorpt_coefficient_mu     15.206
_exptl_absorpt_correction_type    multi-scan
_exptl_absorpt_correction_T_min   ?
_exptl_absorpt_correction_T_max   ?
_exptl_absorpt_process_details    'SADABS 2007/2 (Sheldrick, G.M.,
2007)'

_exptl_special_details
;
 ?
;

_diffrn_ambient_temperature       200(2)
_diffrn_radiation_wavelength      0.67030
_diffrn_radiation_type            'Synchrotron'
_diffrn_radiation_source          'Daresbury SRS'
_diffrn_radiation_monochromator   graphite
_diffrn_measurement_device_type   'Station 9.8'
_diffrn_measurement_method        'CCD slices'
_diffrn_detector_area_resol_mean  ?
_diffrn_standards_number          ?
_diffrn_standards_interval_count  ?
_diffrn_standards_interval_time   ?
_diffrn_standards_decay_%         ?
_diffrn_reflns_number             47924
_diffrn_reflns_av_R_equivalents   0.0365
_diffrn_reflns_av_sigmaI/netI     0.0609
_diffrn_reflns_limit_h_min        -28
_diffrn_reflns_limit_h_max        28
_diffrn_reflns_limit_k_min        -36
_diffrn_reflns_limit_k_max        37
_diffrn_reflns_limit_l_min        -26
_diffrn_reflns_limit_l_max        26
_diffrn_reflns_theta_min          1.32
_diffrn_reflns_theta_max          30.85
_reflns_number_total              24702
_reflns_number_gt                 20264
_reflns_threshold_expression      >2sigma(I)

_computing_data_collection        ?
_computing_cell_refinement        ?
_computing_data_reduction         ?
_computing_structure_solution     'SHELXS-97 (Sheldrick, 1997)'
_computing_structure_refinement   'SHELXL-97 (Sheldrick, 1997)'
_computing_molecular_graphics     'Ortep-3 for Windows (Farrugia,
1997)'
_computing_publication_material   'WinGX (Farrugia, 1999)'

_refine_special_details
;
 Refinement of F^2^ against ALL reflections.  The weighted R-factor
wR and
 goodness of fit S are based on F^2^, conventional R-factors R are
based
 on F, with F set to zero for negative F^2^. The threshold expression
of
 F^2^ > 2sigma(F^2^) is used only for calculating R-factors(gt) etc.
and is
 not relevant to the choice of reflections for refinement.  R-factors
based
 on F^2^ are statistically about twice as large as those based on F,
and R-
 factors based on ALL data will be even larger.
```

```
;

_refine_ls_structure_factor_coef  Fsqd
_refine_ls_matrix_type            full
_refine_ls_weighting_scheme       calc
_refine_ls_weighting_details
 'calc w=1/[\s^2^(Fo^2^)+(0.0373P)^2^+0.0000P] where P=(Fo^2^+2Fc^2
^)/3'
_atom_sites_solution_primary      direct
_atom_sites_solution_secondary    difmap
_atom_sites_solution_hydrogens    geom
_refine_ls_hydrogen_treatment     constr
_refine_ls_extinction_method      none
_refine_ls_extinction_coef        ?
_refine_ls_abs_structure_details
 'Flack H D (1983), Acta Cryst. A39, 876-881'
_refine_ls_abs_structure_Flack    0.035(8)
_refine_ls_number_reflns          24702
_refine_ls_number_parameters      913
_refine_ls_number_restraints      8
_refine_ls_R_factor_all           0.0496
_refine_ls_R_factor_gt            0.0376
_refine_ls_wR_factor_ref          0.0938
_refine_ls_wR_factor_gt           0.0870
_refine_ls_goodness_of_fit_ref    0.990
_refine_ls_restrained_S_all       0.990
_refine_ls_shift/su_max           0.009
_refine_ls_shift/su_mean          0.000

loop_
 _atom_site_label
 _atom_site_type_symbol
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_U_iso_or_equiv
 _atom_site_adp_type
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_symmetry_multiplicity
 _atom_site_calc_flag
 _atom_site_refinement_flags
 _atom_site_disorder_assembly
 _atom_site_disorder_group
C1 C 0.6732(6) 0.2471(4) 0.8106(8) 0.031(2) Uani 1 1 d . . .
H1A H 0.6977 0.2799 0.8394 0.037 Uiso 1 1 calc R . .
H1B H 0.6991 0.2150 0.8401 0.037 Uiso 1 1 calc R . .
C2 C 0.6810(7) 0.2470(5) 0.7266(11) 0.052(4) Uani 1 1 d . . .
H2 H 0.6622 0.2773 0.6929 0.062 Uiso 1 1 calc R . .
C3 C 0.7115(15) 0.2085(10) 0.6966(14) 0.148(12) Uani 1 1 d U . .
H3A H 0.7308 0.1776 0.7287 0.177 Uiso 1 1 calc R . .
H3B H 0.7146 0.2111 0.6423 0.177 Uiso 1 1 calc R . .
C4 C 0.4518(6) 0.2503(3) 1.1247(6) 0.0260(19) Uani 1 1 d . . .
H4A H 0.4810 0.2186 1.1512 0.031 Uiso 1 1 calc R . .
H4B H 0.4782 0.2835 1.1499 0.031 Uiso 1 1 calc R . .
C5 C 0.3769(7) 0.2487(5) 1.1390(7) 0.040(3) Uani 1 1 d . . .
H5 H 0.3492 0.2814 1.1345 0.048 Uiso 1 1 calc R . .
C6 C 0.3484(10) 0.2041(8) 1.1576(9) 0.084(6) Uani 1 1 d . . .
H6A H 0.3754 0.1710 1.1624 0.100 Uiso 1 1 calc R . .
H6B H 0.3007 0.2045 1.1663 0.100 Uiso 1 1 calc R . .
C7 C 0.0753(5) 0.4806(4) 0.7693(6) 0.0261(19) Uani 1 1 d . . .
H7A H 0.0648 0.4646 0.8179 0.031 Uiso 1 1 calc R . .
H7B H 0.0988 0.4520 0.7443 0.031 Uiso 1 1 calc R . .
C8 C 0.0012(5) 0.4965(4) 0.7083(6) 0.029(2) Uani 1 1 d . . .
H8A H -0.0205 0.5284 0.7284 0.034 Uiso 1 1 calc R . .
H8B H 0.0087 0.5057 0.6550 0.034 Uiso 1 1 calc R . .
C9 C -0.0505(6) 0.4474(4) 0.7000(7) 0.032(2) Uani 1 1 d . . .
```

H9A H -0.0244 0.4145 0.6895 0.038 Uiso 1 1 calc R . .
H9B H -0.0632 0.4419 0.7517 0.038 Uiso 1 1 calc R . .
C10 C -0.1214(6) 0.4549(4) 0.6313(7) 0.038(3) Uani 1 1 d . . .
H10A H -0.1380 0.4927 0.6304 0.058 Uiso 1 1 calc R . .
H10B H -0.1600 0.4308 0.6398 0.058 Uiso 1 1 calc R . .
H10C H -0.1119 0.4462 0.5793 0.058 Uiso 1 1 calc R . .
C11 C 0.1487(5) 0.5526(4) 0.7244(6) 0.0260(19) Uani 1 1 d . . .
H11A H 0.1026 0.5690 0.6892 0.031 Uiso 1 1 calc R . .
H11B H 0.1846 0.5824 0.7442 0.031 Uiso 1 1 calc R . .
C12 C 0.1802(7) 0.5149(4) 0.6729(7) 0.036(2) Uani 1 1 d . . .
H12A H 0.1421 0.4878 0.6464 0.043 Uiso 1 1 calc R . .
H12B H 0.2232 0.4951 0.7083 0.043 Uiso 1 1 calc R . .
C13 C 0.2050(8) 0.5462(5) 0.6073(7) 0.048(3) Uani 1 1 d . . .
H13A H 0.2433 0.5729 0.6347 0.057 Uiso 1 1 calc R . .
H13B H 0.2286 0.5202 0.5781 0.057 Uiso 1 1 calc R . .
C14 C 0.1468(9) 0.5745(5) 0.5481(7) 0.054(4) Uani 1 1 d . . .
H14A H 0.1075 0.5489 0.5217 0.080 Uiso 1 1 calc R . .
H14B H 0.1672 0.5911 0.5070 0.080 Uiso 1 1 calc R . .
H14C H 0.1261 0.6029 0.5754 0.080 Uiso 1 1 calc R . .
C15 C 0.1996(5) 0.4999(3) 0.8537(5) 0.0223(18) Uani 1 1 d . . .
H15A H 0.1860 0.4853 0.9014 0.027 Uiso 1 1 calc R . .
H15B H 0.2136 0.4687 0.8246 0.027 Uiso 1 1 calc R . .
C16 C 0.2667(5) 0.5359(4) 0.8840(6) 0.026(2) Uani 1 1 d . . .
H16A H 0.2525 0.5691 0.9084 0.031 Uiso 1 1 calc R . .
H16B H 0.2852 0.5468 0.8376 0.031 Uiso 1 1 calc R . .
C17 C 0.3291(6) 0.5061(4) 0.9481(6) 0.030(2) Uani 1 1 d . . .
H17A H 0.3102 0.4954 0.9942 0.036 Uiso 1 1 calc R . .
H17B H 0.3422 0.4725 0.9236 0.036 Uiso 1 1 calc R . .
C18 C 0.3959(6) 0.5385(4) 0.9791(7) 0.036(2) Uani 1 1 d . . .
H18A H 0.4145 0.5500 0.9337 0.055 Uiso 1 1 calc R . .
H18B H 0.4339 0.5168 1.0173 0.055 Uiso 1 1 calc R . .
H18C H 0.3843 0.5706 1.0070 0.055 Uiso 1 1 calc R . .
C19 C 0.1006(5) 0.5717(3) 0.8389(5) 0.0215(17) Uani 1 1 d . . .
H19A H 0.1394 0.5998 0.8565 0.026 Uiso 1 1 calc R . .
H19B H 0.0581 0.5885 0.7983 0.026 Uiso 1 1 calc R . .
C20 C 0.0756(6) 0.5556(4) 0.9107(7) 0.031(2) Uani 1 1 d . . .
H20A H 0.1182 0.5412 0.9540 0.038 Uiso 1 1 calc R . .
H20B H 0.0376 0.5267 0.8950 0.038 Uiso 1 1 calc R . .
C21 C 0.0435(5) 0.6038(4) 0.9423(6) 0.0251(19) Uani 1 1 d . . .
H21A H 0.0023 0.6189 0.8980 0.030 Uiso 1 1 calc R . .
H21B H 0.0821 0.6322 0.9591 0.030 Uiso 1 1 calc R . .
C22 C 0.0144(7) 0.5893(4) 1.0149(7) 0.037(3) Uani 1 1 d . . .
H22A H -0.0267 0.5634 0.9975 0.056 Uiso 1 1 calc R . .
H22B H -0.0032 0.6223 1.0357 0.056 Uiso 1 1 calc R . .
H22C H 0.0545 0.5729 1.0581 0.056 Uiso 1 1 calc R . .
C23 C 0.5780(5) 0.5109(3) 0.7560(5) 0.0184(16) Uani 1 1 d . . .
H23A H 0.5982 0.5381 0.7255 0.022 Uiso 1 1 calc R . .
H23B H 0.5731 0.5286 0.8061 0.022 Uiso 1 1 calc R . .
C24 C 0.5011(5) 0.4943(4) 0.7043(6) 0.0260(19) Uani 1 1 d . . .
H24A H 0.4783 0.4701 0.7367 0.031 Uiso 1 1 calc R . .
H24B H 0.5060 0.4735 0.6566 0.031 Uiso 1 1 calc R . .
C25 C 0.4488(6) 0.5440(4) 0.6740(7) 0.033(2) Uani 1 1 d . . .
H25A H 0.4710 0.5678 0.6407 0.039 Uiso 1 1 calc R . .
H25B H 0.4005 0.5309 0.6389 0.039 Uiso 1 1 calc R . .
C26 C 0.4361(7) 0.5758(5) 0.7415(9) 0.051(3) Uani 1 1 d . . .
H26A H 0.4087 0.5537 0.7709 0.077 Uiso 1 1 calc R . .
H26B H 0.4072 0.6083 0.7199 0.077 Uiso 1 1 calc R . .
H26C H 0.4839 0.5865 0.7788 0.077 Uiso 1 1 calc R . .
C27 C 0.6479(5) 0.4395(3) 0.7044(5) 0.0199(16) Uani 1 1 d . . .
H27A H 0.6838 0.4095 0.7224 0.024 Uiso 1 1 calc R . .
H27B H 0.6010 0.4234 0.6706 0.024 Uiso 1 1 calc R . .
C28 C 0.6776(5) 0.4770(4) 0.6511(6) 0.0265(19) Uani 1 1 d . . .
H28A H 0.7277 0.4899 0.6814 0.032 Uiso 1 1 calc R . .
H28B H 0.6447 0.5090 0.6358 0.032 Uiso 1 1 calc R . .
C29 C 0.6816(6) 0.4463(4) 0.5728(6) 0.027(2) Uani 1 1 d . . .
H29A H 0.7104 0.4686 0.5443 0.032 Uiso 1 1 calc R . .

H29B H 0.7090 0.4119 0.5891 0.032 Uiso 1 1 calc R . .
C30 C 0.6065(6) 0.4335(5) 0.5138(7) 0.039(3) Uani 1 1 d . . .
H30A H 0.5837 0.4031 0.5348 0.058 Uiso 1 1 calc R . .
H30B H 0.6130 0.4237 0.4608 0.058 Uiso 1 1 calc R . .
H30C H 0.5743 0.4655 0.5076 0.058 Uiso 1 1 calc R . .
C31 C 0.7033(5) 0.4898(3) 0.8345(5) 0.0227(18) Uani 1 1 d . . .
H31A H 0.7171 0.5212 0.8056 0.027 Uiso 1 1 calc R . .
H31B H 0.6924 0.5040 0.8839 0.027 Uiso 1 1 calc R . .
C32 C 0.7698(5) 0.4526(3) 0.8607(5) 0.0214(17) Uani 1 1 d . . .
H32A H 0.7917 0.4473 0.8151 0.026 Uiso 1 1 calc R . .
H32B H 0.7540 0.4167 0.8760 0.026 Uiso 1 1 calc R . .
C33 C 0.8275(6) 0.4772(4) 0.9332(6) 0.030(2) Uani 1 1 d . . .
H33A H 0.8391 0.5144 0.9186 0.035 Uiso 1 1 calc R . .
H33B H 0.8057 0.4802 0.9793 0.035 Uiso 1 1 calc R . .
C34 C 0.8986(6) 0.4455(5) 0.9604(7) 0.041(3) Uani 1 1 d . . .
H34A H 0.8908 0.4133 0.9906 0.061 Uiso 1 1 calc R . .
H34B H 0.9373 0.4682 0.9957 0.061 Uiso 1 1 calc R . .
H34C H 0.9139 0.4342 0.9127 0.061 Uiso 1 1 calc R . .
C35 C 0.6021(4) 0.4201(3) 0.8222(5) 0.0160(15) Uani 1 1 d . . .
H35A H 0.5580 0.4044 0.7824 0.019 Uiso 1 1 calc R . .
H35B H 0.6398 0.3910 0.8378 0.019 Uiso 1 1 calc R . .
C36 C 0.5801(6) 0.4366(4) 0.8968(6) 0.029(2) Uani 1 1 d . . .
H36A H 0.5434 0.4664 0.8827 0.034 Uiso 1 1 calc R . .
H36B H 0.6243 0.4501 0.9387 0.034 Uiso 1 1 calc R . .
C37 C 0.5470(5) 0.3892(4) 0.9307(5) 0.0238(18) Uani 1 1 d . . .
H37A H 0.5844 0.3600 0.9463 0.029 Uiso 1 1 calc R . .
H37B H 0.5041 0.3749 0.8878 0.029 Uiso 1 1 calc R . .
C38 C 0.5215(6) 0.4049(4) 1.0042(6) 0.0256(19) Uani 1 1 d . . .
H38A H 0.5634 0.4205 1.0462 0.038 Uiso 1 1 calc R . .
H38B H 0.5033 0.3727 1.0259 0.038 Uiso 1 1 calc R . .
H38C H 0.4816 0.4318 0.9881 0.038 Uiso 1 1 calc R . .
C39 C 0.9318(7) 0.2872(5) 0.9361(7) 0.044(3) Uani 1 1 d . . .
H39A H 0.9581 0.3182 0.9684 0.053 Uiso 1 1 calc R . .
H39B H 0.9147 0.2631 0.9734 0.053 Uiso 1 1 calc R . .
C40 C 0.8641(7) 0.3085(5) 0.8713(7) 0.048(3) Uani 1 1 d . . .
H40A H 0.8800 0.3352 0.8373 0.071 Uiso 1 1 calc R . .
H40B H 0.8299 0.3257 0.8976 0.071 Uiso 1 1 calc R . .
H40C H 0.8390 0.2783 0.8373 0.071 Uiso 1 1 calc R . .
C41 C 0.9521(8) 0.2073(5) 0.8539(9) 0.056(4) Uani 1 1 d . . .
H41A H 0.9923 0.1844 0.8448 0.067 Uiso 1 1 calc R . .
H41B H 0.9209 0.2194 0.8000 0.067 Uiso 1 1 calc R . .
C42 C 0.9048(10) 0.1727(5) 0.8935(9) 0.063(5) Uani 1 1 d . . .
H42A H 0.9158 0.1822 0.9513 0.094 Uiso 1 1 calc R . .
H42B H 0.9159 0.1343 0.8883 0.094 Uiso 1 1 calc R . .
H42C H 0.8521 0.1795 0.8666 0.094 Uiso 1 1 calc R . .
C43 C 1.0467(6) 0.2391(5) 0.9757(8) 0.042(3) Uani 1 1 d . . .
H43A H 1.0668 0.2717 1.0082 0.050 Uiso 1 1 calc R . .
H43B H 1.0253 0.2152 1.0098 0.050 Uiso 1 1 calc R . .
C44 C 1.1085(8) 0.2099(6) 0.9553(10) 0.069(5) Uani 1 1 d . . .
H44A H 1.0891 0.1771 0.9240 0.103 Uiso 1 1 calc R . .
H44B H 1.1461 0.1997 1.0055 0.103 Uiso 1 1 calc R . .
H44C H 1.1309 0.2336 0.9228 0.103 Uiso 1 1 calc R . .
C45 C 1.0124(8) 0.2908(5) 0.8455(7) 0.045(3) Uani 1 1 d . . .
H45A H 0.9691 0.3039 0.8018 0.054 Uiso 1 1 calc R . .
H45B H 1.0440 0.2690 0.8198 0.054 Uiso 1 1 calc R . .
C46 C 1.0597(8) 0.3428(5) 0.8918(9) 0.057(4) Uani 1 1 d . . .
H46A H 1.0261 0.3683 0.9075 0.085 Uiso 1 1 calc R . .
H46B H 1.0839 0.3609 0.8552 0.085 Uiso 1 1 calc R . .
H46C H 1.0975 0.3304 0.9406 0.085 Uiso 1 1 calc R . .
N1 N 0.1310(4) 0.5269(3) 0.7971(5) 0.0204(15) Uani 1 1 d . . .
N2 N 0.6330(4) 0.4650(3) 0.7800(5) 0.0199(15) Uani 1 1 d . . .
N3 N 0.9862(6) 0.2560(3) 0.9017(6) 0.035(2) Uani 1 1 d . . .
O1 O 0.0808(3) 0.1492(3) 0.7065(4) 0.0241(14) Uani 1 1 d . . .
O2 O 0.1535(3) 0.2472(2) 0.7002(4) 0.0189(12) Uani 1 1 d . . .
O3 O 0.0821(3) 0.3471(2) 0.7021(4) 0.0195(12) Uani 1 1 d . . .
O4 O 0.1696(3) 0.3285(2) 0.5960(4) 0.0172(11) Uani 1 1 d . . .

```
O5 O 0.2334(3) 0.3438(3) 0.4672(4) 0.0217(13) Uani 1 1 d . . .
O6 O 0.2498(4) 0.2451(2) 0.5534(4) 0.0182(12) Uani 1 1 d . . .
O7 O 0.2322(4) 0.1464(2) 0.4717(4) 0.0223(13) Uani 1 1 d . . .
O8 O 0.1690(3) 0.1645(2) 0.6008(4) 0.0188(12) Uani 1 1 d . . .
O9 O 0.2223(3) 0.1047(2) 0.7346(4) 0.0193(12) Uani 1 1 d . . .
O10 O 0.2103(4) 0.1825(2) 0.8262(4) 0.0192(13) Uani 1 1 d . . .
O11 O 0.2105(3) 0.3146(2) 0.8241(4) 0.0171(12) Uani 1 1 d . . .
O12 O 0.2226(3) 0.3899(2) 0.7284(4) 0.0176(12) Uani 1 1 d . . .
O13 O 0.2923(3) 0.3885(2) 0.6203(4) 0.0219(13) Uani 1 1 d . . .
O14 O 0.3669(3) 0.3115(2) 0.5846(4) 0.0172(12) Uani 1 1 d . . .
O15 O 0.3662(3) 0.1794(2) 0.5872(4) 0.0170(12) Uani 1 1 d . . .
O16 O 0.2921(3) 0.1035(2) 0.6276(4) 0.0190(12) Uani 1 1 d . . .
O17 O 0.2868(3) 0.1919(2) 0.7056(3) 0.0137(11) Uani 1 1 d . . .
O18 O 0.2877(3) 0.3017(2) 0.7035(3) 0.0155(11) Uani 1 1 d . . .
O19 O 0.3347(4) 0.24853(19) 0.8402(4) 0.0164(12) Uani 1 1 d . . .
O20 O 0.4103(3) 0.2465(2) 0.7242(4) 0.0152(11) Uani 1 1 d . . .
O21 O 0.2766(4) 0.1389(3) 0.9774(4) 0.0270(14) Uani 1 1 d . . .
O22 O 0.2742(4) 0.2498(2) 0.9535(4) 0.0219(13) Uani 1 1 d . . .
O23 O 0.2769(4) 0.3602(3) 0.9730(4) 0.0274(14) Uani 1 1 d . . .
O24 O 0.3424(3) 0.3628(2) 0.8449(4) 0.0197(12) Uani 1 1 d . . .
O25 O 0.3490(3) 0.4569(2) 0.7577(4) 0.0212(13) Uani 1 1 d . . .
O26 O 0.4187(3) 0.3613(2) 0.7277(4) 0.0168(12) Uani 1 1 d . . .
O27 O 0.5062(3) 0.3549(2) 0.6203(4) 0.0201(12) Uani 1 1 d . . .
O28 O 0.4872(4) 0.2448(2) 0.6247(4) 0.0174(12) Uani 1 1 d . . .
O29 O 0.5059(4) 0.1338(3) 0.6245(4) 0.0243(14) Uani 1 1 d . . .
O30 O 0.4179(3) 0.1318(2) 0.7331(4) 0.0171(12) Uani 1 1 d . . .
O31 O 0.3490(3) 0.0378(2) 0.7668(4) 0.0229(13) Uani 1 1 d . . .
O32 O 0.3421(3) 0.1342(2) 0.8496(4) 0.0186(12) Uani 1 1 d . . .
O33 O 0.4033(4) 0.1985(3) 0.9812(4) 0.0229(13) Uani 1 1 d . . .
O34 O 0.4022(3) 0.3010(2) 0.9789(4) 0.0201(12) Uani 1 1 d . . .
O35 O 0.5420(3) 0.2973(2) 0.7643(4) 0.0196(12) Uani 1 1 d . . .
O36 O 0.5427(3) 0.1949(2) 0.7665(4) 0.0192(12) Uani 1 1 d . . .
O37 O 0.5772(5) 0.2465(2) 0.8988(5) 0.0370(19) Uani 1 1 d . . .
O38 O 0.5245(4) 0.2504(2) 1.0132(5) 0.0310(17) Uani 1 1 d . . .
Si1 Si 0.33259(13) 0.24693(8) 0.74588(15) 0.0116(4) Uani 1 1 d . . .
W1 W 0.168351(18) 0.171065(13) 0.71119(2) 0.01582(7) Uani 1 1 d . . .
W2 W 0.168782(18) 0.323468(13) 0.70692(2) 0.01539(7) Uani 1 1 d . . .
W3 W 0.25989(2) 0.321933(13) 0.56633(2) 0.01615(7) Uani 1 1 d . . .
W4 W 0.259228(19) 0.169225(13) 0.57016(2) 0.01605(7) Uani 1 1 d . . .
W5 W 0.29938(2) 0.182851(13) 0.91160(2) 0.01758(7) Uani 1 1 d . . .
W6 W 0.299136(19) 0.315430(13) 0.90837(2) 0.01707(7) Uani 1 1 d . . .
W7 W 0.327966(19) 0.389907(13) 0.73844(2) 0.01598(7) Uani 1 1 d . . .
W8 W 0.457847(19) 0.311571(12) 0.66444(2) 0.01492(6) Uani 1 1 d . . .
W9 W 0.457807(19) 0.179205(12) 0.66654(2) 0.01515(7) Uani 1 1 d . . .
W10 W 0.327626(19) 0.104429(13) 0.74463(2) 0.01628(8) Uani 1 1 d . .
.
P1 P 0.57745(13) 0.24610(8) 0.81324(15) 0.0199(4) Uani 1 1 d . . .
P2 P 0.44560(14) 0.24987(9) 1.01791(16) 0.0221(5) Uani 1 1 d . . .

loop_
 _atom_site_aniso_label
 _atom_site_aniso_U_11
 _atom_site_aniso_U_22
 _atom_site_aniso_U_33
 _atom_site_aniso_U_23
 _atom_site_aniso_U_13
 _atom_site_aniso_U_12
C1 0.014(4) 0.023(5) 0.054(7) -0.002(4) 0.006(4) 0.006(3)
C2 0.024(6) 0.063(9) 0.080(11) -0.016(7) 0.032(7) 0.000(5)
C3 0.20(3) 0.15(2) 0.124(18) -0.077(16) 0.110(19) -0.14(2)
C4 0.021(4) 0.034(5) 0.021(4) 0.001(3) 0.003(3) 0.005(4)
C5 0.034(6) 0.062(8) 0.025(5) 0.011(5) 0.012(4) 0.001(5)
C6 0.085(14) 0.117(15) 0.054(10) 0.000(10) 0.028(9) 0.048(11)
C7 0.018(4) 0.023(4) 0.036(5) -0.003(4) 0.008(4) -0.004(3)
C8 0.020(5) 0.022(4) 0.039(6) -0.003(4) 0.001(4) 0.009(3)
C9 0.025(5) 0.023(4) 0.045(6) -0.012(4) 0.007(4) -0.001(4)
```

C10	0.027(6)	0.036(5)	0.048(7)	-0.008(5)	0.003(5)	0.005(4)
C11	0.023(5)	0.025(4)	0.031(5)	-0.004(4)	0.008(4)	0.002(3)
C12	0.041(7)	0.030(5)	0.039(6)	-0.005(4)	0.013(5)	0.000(4)
C13	0.056(9)	0.049(7)	0.046(7)	-0.006(6)	0.027(7)	0.001(6)
C14	0.092(12)	0.041(7)	0.038(7)	0.007(5)	0.035(8)	0.012(7)
C15	0.021(4)	0.016(4)	0.024(4)	-0.006(3)	-0.001(3)	0.002(3)
C16	0.022(5)	0.021(4)	0.026(5)	0.001(3)	-0.005(4)	0.001(3)
C17	0.031(6)	0.026(5)	0.031(5)	-0.005(4)	0.005(4)	0.005(4)
C18	0.031(6)	0.028(5)	0.041(6)	0.004(4)	-0.004(5)	0.000(4)
C19	0.018(4)	0.017(4)	0.028(5)	-0.006(3)	0.005(3)	0.002(3)
C20	0.030(6)	0.019(4)	0.047(6)	-0.001(4)	0.014(5)	0.013(4)
C21	0.020(4)	0.025(4)	0.027(5)	-0.006(3)	0.003(4)	0.006(3)
C22	0.047(7)	0.034(5)	0.037(6)	0.003(4)	0.022(5)	0.016(5)
C23	0.016(4)	0.015(3)	0.022(4)	0.001(3)	0.002(3)	0.003(3)
C24	0.020(5)	0.029(5)	0.028(5)	-0.002(4)	0.005(4)	-0.001(4)
C25	0.028(6)	0.035(5)	0.041(6)	0.005(4)	0.018(5)	0.008(4)
C26	0.038(7)	0.044(7)	0.079(10)	-0.001(6)	0.028(7)	0.002(5)
C27	0.018(4)	0.017(4)	0.026(4)	0.000(3)	0.008(3)	-0.005(3)
C28	0.022(5)	0.028(5)	0.032(5)	0.000(4)	0.012(4)	-0.007(4)
C29	0.030(5)	0.026(4)	0.031(5)	-0.002(4)	0.018(4)	-0.006(4)
C30	0.040(7)	0.044(6)	0.034(6)	-0.005(5)	0.012(5)	-0.014(5)
C31	0.024(5)	0.022(4)	0.019(4)	-0.002(3)	0.003(3)	-0.008(3)
C32	0.016(4)	0.023(4)	0.025(4)	0.000(3)	0.005(3)	-0.004(3)
C33	0.022(5)	0.034(5)	0.030(5)	0.004(4)	0.003(4)	0.005(4)
C34	0.021(5)	0.045(6)	0.049(7)	0.005(5)	-0.001(5)	-0.002(4)
C35	0.013(4)	0.013(3)	0.021(4)	0.004(3)	0.004(3)	-0.005(3)
C36	0.028(5)	0.022(4)	0.038(6)	-0.003(4)	0.013(4)	-0.007(4)
C37	0.024(5)	0.024(4)	0.022(4)	-0.002(3)	0.005(4)	-0.001(4)
C38	0.026(5)	0.028(5)	0.024(5)	0.001(3)	0.009(4)	-0.001(4)
C39	0.041(7)	0.057(8)	0.037(6)	0.000(5)	0.016(5)	0.009(6)
C40	0.046(8)	0.062(8)	0.027(6)	-0.006(5)	-0.003(5)	0.009(6)
C41	0.060(9)	0.038(7)	0.061(9)	0.003(6)	0.005(7)	-0.007(6)
C42	0.103(14)	0.041(7)	0.062(9)	-0.012(6)	0.053(10)	-0.021(7)
C43	0.024(5)	0.066(8)	0.042(7)	0.009(5)	0.021(5)	0.012(5)
C44	0.045(8)	0.067(9)	0.113(13)	0.030(9)	0.052(9)	0.029(7)
C45	0.071(9)	0.039(6)	0.032(6)	0.007(5)	0.026(6)	0.010(6)
C46	0.065(10)	0.044(7)	0.078(10)	-0.016(7)	0.047(8)	-0.015(6)
N1	0.018(4)	0.013(3)	0.028(4)	-0.001(3)	0.003(3)	0.001(3)
N2	0.019(4)	0.014(3)	0.025(4)	0.003(3)	0.004(3)	-0.005(3)
N3	0.042(6)	0.037(5)	0.029(5)	-0.009(4)	0.017(4)	0.002(4)
O1	0.014(3)	0.023(3)	0.036(4)	-0.001(3)	0.009(3)	-0.006(2)
O2	0.012(3)	0.021(3)	0.022(3)	0.001(2)	0.004(2)	-0.003(2)
O3	0.014(3)	0.021(3)	0.023(3)	-0.006(2)	0.006(2)	0.000(2)
O4	0.011(3)	0.017(3)	0.022(3)	-0.001(2)	0.002(2)	-0.002(2)
O5	0.018(3)	0.026(3)	0.018(3)	0.011(2)	0.001(2)	0.002(2)
O6	0.015(3)	0.021(3)	0.018(3)	-0.002(2)	0.004(2)	0.002(2)
O7	0.023(3)	0.020(3)	0.023(3)	-0.006(2)	0.005(3)	-0.002(2)
O8	0.012(3)	0.015(3)	0.031(3)	-0.002(2)	0.009(2)	-0.006(2)
O9	0.012(3)	0.015(3)	0.031(3)	0.001(2)	0.006(2)	-0.003(2)
O10	0.016(3)	0.016(3)	0.028(3)	0.003(2)	0.010(3)	0.000(2)
O11	0.016(3)	0.011(2)	0.024(3)	-0.005(2)	0.006(2)	-0.002(2)
O12	0.012(3)	0.014(3)	0.027(3)	-0.001(2)	0.006(2)	0.007(2)
O13	0.019(3)	0.025(3)	0.022(3)	0.001(2)	0.006(2)	0.001(2)
O14	0.013(3)	0.015(3)	0.025(3)	0.001(2)	0.007(2)	-0.001(2)
O15	0.016(3)	0.017(3)	0.016(3)	-0.003(2)	0.002(2)	-0.002(2)
O16	0.014(3)	0.021(3)	0.023(3)	-0.003(2)	0.006(2)	-0.003(2)
O17	0.010(3)	0.018(3)	0.013(3)	-0.002(2)	0.002(2)	-0.004(2)
O18	0.011(3)	0.017(3)	0.019(3)	-0.001(2)	0.006(2)	0.001(2)
O19	0.018(3)	0.012(3)	0.020(3)	-0.002(2)	0.006(2)	-0.002(2)
O20	0.009(2)	0.018(3)	0.019(3)	0.002(2)	0.004(2)	0.0003(19)
O21	0.024(4)	0.033(4)	0.026(3)	0.005(3)	0.010(3)	-0.001(3)
O22	0.020(3)	0.025(3)	0.023(3)	0.002(2)	0.009(3)	-0.001(2)
O23	0.022(4)	0.031(4)	0.032(4)	-0.009(3)	0.012(3)	-0.006(3)
O24	0.018(3)	0.019(3)	0.023(3)	-0.005(2)	0.006(2)	-0.002(2)
O25	0.020(3)	0.013(3)	0.032(3)	0.000(2)	0.010(3)	0.005(2)
O26	0.008(3)	0.016(3)	0.027(3)	0.000(2)	0.006(2)	0.000(2)

```
O27 0.015(3) 0.021(3) 0.025(3) -0.001(2) 0.007(2) -0.001(2)
O28 0.015(3) 0.016(3) 0.022(3) -0.003(2) 0.008(2) -0.004(2)
O29 0.023(3) 0.021(3) 0.031(4) 0.001(3) 0.010(3) 0.005(2)
O30 0.015(3) 0.014(3) 0.024(3) 0.000(2) 0.007(2) -0.003(2)
O31 0.016(3) 0.017(3) 0.036(4) 0.004(2) 0.007(3) 0.002(2)
O32 0.014(3) 0.018(3) 0.023(3) 0.002(2) 0.004(2) -0.002(2)
O33 0.020(3) 0.024(3) 0.023(3) -0.003(2) 0.004(3) -0.001(3)
O34 0.020(3) 0.022(3) 0.019(3) -0.007(2) 0.005(2) -0.007(2)
O35 0.012(3) 0.018(3) 0.026(3) 0.000(2) 0.001(2) 0.001(2)
O36 0.017(3) 0.021(3) 0.020(3) -0.001(2) 0.005(2) 0.001(2)
O37 0.045(5) 0.029(4) 0.034(4) 0.003(3) 0.007(4) 0.004(3)
O38 0.021(3) 0.034(4) 0.039(4) 0.002(3) 0.011(3) 0.002(3)
Si1 0.0091(9) 0.0134(9) 0.0133(9) -0.0003(7) 0.0048(7) -0.0016(7)
W1 0.01071(15) 0.01365(13) 0.02376(19) -0.00096(14) 0.00595(13) -
0.00148(14)
W2 0.01039(15) 0.01416(13) 0.02174(18) 0.00003(14) 0.00475(13)
0.00082(14)
W3 0.01413(16) 0.01605(14) 0.01782(17) 0.00213(16) 0.00376(13) -
0.00024(17)
W4 0.01294(15) 0.01577(14) 0.01906(17) -0.00341(17) 0.00391(13) -
0.00141(17)
W5 0.01527(17) 0.01885(15) 0.01969(18) 0.00265(12) 0.00666(14)
0.00007(12)
W6 0.01474(17) 0.01866(15) 0.01850(17) -0.00248(12) 0.00583(13)
0.00024(12)
W7 0.01276(15) 0.01225(13) 0.0237(2) -0.00139(14) 0.00648(14) -
0.00078(14)
W8 0.01172(15) 0.01444(13) 0.01952(16) -0.00059(16) 0.00589(12) -
0.00160(17)
W9 0.01174(15) 0.01420(13) 0.02053(17) -0.00078(16) 0.00624(12)
0.00029(17)
W10 0.01310(15) 0.01189(13) 0.0249(2) 0.00070(14) 0.00713(14) 0.00021
(14)
P1 0.0134(9) 0.0205(10) 0.0248(11) -0.0011(8) 0.0037(8) 0.0002(8)
P2 0.0159(10) 0.0257(12) 0.0235(11) -0.0003(9) 0.0038(8) 0.0013(8)

_geom_special_details
;
 All esds (except the esd in the dihedral angle between two l.s.
planes)
 are estimated using the full covariance matrix.  The cell esds are
taken
 into account individually in the estimation of esds in distances,
angles
 and torsion angles; correlations between esds in cell parameters are
only
 used when they are defined by crystal symmetry.  An approximate
(isotropic)
 treatment of cell esds is used for estimating esds involving l.s.
planes.
;

loop_
 _geom_bond_atom_site_label_1
 _geom_bond_atom_site_label_2
 _geom_bond_distance
 _geom_bond_site_symmetry_2
 _geom_bond_publ_flag
C1 C2 1.49(2) . ?
C1 P1 1.811(11) . ?
C2 C3 1.29(3) . ?
C4 C5 1.495(16) . ?
C4 P2 1.800(11) . ?
C5 C6 1.30(2) . ?
C7 N1 1.530(11) . ?
C7 C8 1.537(13) . ?
```

C8 C9 1.533(14) . ?
C9 C10 1.519(14) . ?
C11 C12 1.513(13) . ?
C11 N1 1.516(12) . ?
C12 C13 1.540(15) . ?
C13 C14 1.444(18) . ?
C15 C16 1.508(12) . ?
C15 N1 1.528(11) . ?
C16 C17 1.546(13) . ?
C17 C18 1.454(14) . ?
C19 C20 1.489(13) . ?
C19 N1 1.513(10) . ?
C20 C21 1.500(12) . ?
C21 C22 1.536(14) . ?
C23 N2 1.508(10) . ?
C23 C24 1.521(12) . ?
C24 C25 1.565(13) . ?
C25 C26 1.471(15) . ?
C27 C28 1.511(12) . ?
C27 N2 1.536(11) . ?
C28 C29 1.560(13) . ?
C29 C30 1.519(14) . ?
C31 C32 1.511(12) . ?
C31 N2 1.514(11) . ?
C32 C33 1.525(13) . ?
C33 C34 1.503(14) . ?
C35 C36 1.505(12) . ?
C35 N2 1.522(10) . ?
C36 C37 1.513(13) . ?
C37 C38 1.518(12) . ?
C39 N3 1.524(14) . ?
C39 C40 1.525(16) . ?
C41 N3 1.491(15) . ?
C41 C42 1.523(17) . ?
C43 C44 1.489(15) . ?
C43 N3 1.504(16) . ?
C45 N3 1.473(14) . ?
C45 C46 1.632(17) . ?
O1 W1 1.709(6) . ?
O2 W1 1.897(5) . ?
O2 W2 1.901(5) . ?
O3 W2 1.709(6) . ?
O4 W2 1.908(6) . ?
O4 W3 1.910(6) . ?
O5 W3 1.717(6) . ?
O6 W4 1.892(5) . ?
O6 W3 1.909(5) . ?
O7 W4 1.713(6) . ?
O8 W1 1.902(6) . ?
O8 W4 1.913(6) . ?
O9 W1 1.905(6) . ?
O9 W10 1.937(6) . ?
O10 W5 1.886(7) . ?
O10 W1 1.924(7) . ?
O11 W6 1.870(6) . ?
O11 W2 1.949(6) . ?
O12 W2 1.905(6) . ?
O12 W7 1.936(6) . ?
O13 W3 1.898(6) . ?
O13 W7 1.944(6) . ?
O14 W8 1.863(6) . ?
O14 W3 1.961(6) . ?
O15 W9 1.867(6) . ?
O15 W4 1.962(6) . ?
O16 W4 1.905(6) . ?
O16 W10 1.926(6) . ?

```
O17 Si1 1.649(6) . ?
O17 W4 2.299(5) . ?
O17 W1 2.311(6) . ?
O17 W10 2.321(6) . ?
O18 Si1 1.647(6) . ?
O18 W2 2.313(6) . ?
O18 W3 2.313(6) . ?
O18 W7 2.323(6) . ?
O19 Si1 1.606(7) . ?
O19 W6 2.229(6) . ?
O19 W5 2.239(6) . ?
O20 Si1 1.604(7) . ?
O20 W8 2.222(6) . ?
O20 W9 2.239(6) . ?
O21 W5 1.703(6) . ?
O22 W6 1.907(6) . ?
O22 W5 1.911(6) . ?
O23 W6 1.696(6) . ?
O24 W7 1.889(6) . ?
O24 W6 1.924(6) . ?
O25 W7 1.706(6) . ?
O26 W7 1.901(6) . ?
O26 W8 1.913(6) . ?
O27 W8 1.710(6) . ?
O28 W9 1.912(5) . ?
O28 W8 1.919(5) . ?
O29 W9 1.718(6) . ?
O30 W10 1.886(6) . ?
O30 W9 1.926(6) . ?
O31 W10 1.708(6) . ?
O32 W10 1.889(6) . ?
O32 W5 1.921(6) . ?
O33 P2 1.532(7) . ?
O33 W5 2.015(6) . ?
O34 P2 1.547(7) . ?
O34 W6 2.002(6) . ?
O35 P1 1.556(6) . ?
O35 W8 2.006(6) . ?
O36 P1 1.536(6) . ?
O36 W9 2.021(6) . ?
O37 P1 1.468(9) . ?
O38 P2 1.506(8) . ?

loop_
 _geom_angle_atom_site_label_1
 _geom_angle_atom_site_label_2
 _geom_angle_atom_site_label_3
 _geom_angle
 _geom_angle_site_symmetry_1
 _geom_angle_site_symmetry_3
 _geom_angle_publ_flag
C2 C1 P1 113.2(9) . . ?
C3 C2 C1 124.4(17) . . ?
C5 C4 P2 111.9(7) . . ?
C6 C5 C4 122.2(12) . . ?
N1 C7 C8 115.5(7) . . ?
C9 C8 C7 106.9(8) . . ?
C10 C9 C8 111.6(9) . . ?
C12 C11 N1 115.7(8) . . ?
C11 C12 C13 111.5(9) . . ?
C14 C13 C12 115.5(11) . . ?
C16 C15 N1 115.8(7) . . ?
C15 C16 C17 111.0(8) . . ?
C18 C17 C16 113.6(8) . . ?
C20 C19 N1 116.6(7) . . ?
C19 C20 C21 109.9(8) . . ?
```

```
C20 C21 C22 112.2(8) . . ?
N2 C23 C24 114.9(7) . . ?
C23 C24 C25 112.7(8) . . ?
C26 C25 C24 112.4(10) . . ?
C28 C27 N2 116.5(7) . . ?
C27 C28 C29 109.8(7) . . ?
C30 C29 C28 114.3(8) . . ?
C32 C31 N2 116.2(7) . . ?
C31 C32 C33 109.8(7) . . ?
C34 C33 C32 114.2(9) . . ?
C36 C35 N2 116.1(7) . . ?
C35 C36 C37 111.1(7) . . ?
C36 C37 C38 112.5(8) . . ?
N3 C39 C40 113.8(9) . . ?
N3 C41 C42 114.8(11) . . ?
C44 C43 N3 112.9(11) . . ?
N3 C45 C46 112.0(9) . . ?
C19 N1 C11 106.4(6) . . ?
C19 N1 C15 112.4(7) . . ?
C11 N1 C15 111.3(7) . . ?
C19 N1 C7 112.0(7) . . ?
C11 N1 C7 110.2(7) . . ?
C15 N1 C7 104.7(6) . . ?
C23 N2 C31 106.0(6) . . ?
C23 N2 C35 110.6(7) . . ?
C31 N2 C35 112.6(6) . . ?
C23 N2 C27 110.5(7) . . ?
C31 N2 C27 110.4(7) . . ?
C35 N2 C27 106.8(6) . . ?
C45 N3 C41 106.2(9) . . ?
C45 N3 C43 113.6(10) . . ?
C41 N3 C43 110.1(9) . . ?
C45 N3 C39 110.2(9) . . ?
C41 N3 C39 112.8(10) . . ?
C43 N3 C39 104.1(8) . . ?
W1 O2 W2 163.0(4) . . ?
W2 O4 W3 121.1(3) . . ?
W4 O6 W3 163.8(4) . . ?
W1 O8 W4 121.5(3) . . ?
W1 O9 W10 119.3(3) . . ?
W5 O10 W1 144.3(4) . . ?
W6 O11 W2 143.6(3) . . ?
W2 O12 W7 119.3(3) . . ?
W3 O13 W7 119.4(3) . . ?
W8 O14 W3 143.4(3) . . ?
W9 O15 W4 143.3(3) . . ?
W4 O16 W10 119.6(3) . . ?
Si1 O17 W4 124.3(3) . . ?
Si1 O17 W1 124.0(3) . . ?
W4 O17 W1 92.4(2) . . ?
Si1 O17 W10 123.6(3) . . ?
W4 O17 W10 91.56(19) . . ?
W1 O17 W10 91.47(19) . . ?
Si1 O18 W2 123.8(3) . . ?
Si1 O18 W3 124.4(3) . . ?
W2 O18 W3 91.9(2) . . ?
Si1 O18 W7 124.3(3) . . ?
W2 O18 W7 91.30(19) . . ?
W3 O18 W7 91.4(2) . . ?
Si1 O19 W6 128.3(3) . . ?
Si1 O19 W5 127.2(3) . . ?
W6 O19 W5 94.0(2) . . ?
Si1 O20 W8 127.7(3) . . ?
Si1 O20 W9 127.5(3) . . ?
W8 O20 W9 94.0(2) . . ?
W6 O22 W5 117.7(4) . . ?
```

```
W7 O24 W6 142.3(3) . . ?
W7 O26 W8 142.2(3) . . ?
W9 O28 W8 116.7(3) . . ?
W10 O30 W9 142.2(3) . . ?
W10 O32 W5 143.0(3) . . ?
P2 O33 W5 134.8(4) . . ?
P2 O34 W6 135.0(4) . . ?
P1 O35 W8 135.7(4) . . ?
P1 O36 W9 135.7(4) . . ?
O20 Si1 O19 117.9(4) . . ?
O20 Si1 O18 106.8(3) . . ?
O19 Si1 O18 106.7(3) . . ?
O20 Si1 O17 107.3(3) . . ?
O19 Si1 O17 107.6(3) . . ?
O18 Si1 O17 110.4(3) . . ?
O1 W1 O2 101.2(3) . . ?
O1 W1 O8 101.7(3) . . ?
O2 W1 O8 91.6(3) . . ?
O1 W1 O9 100.7(3) . . ?
O2 W1 O9 157.4(2) . . ?
O8 W1 O9 89.1(3) . . ?
O1 W1 O10 101.8(3) . . ?
O2 W1 O10 87.9(3) . . ?
O8 W1 O10 156.2(3) . . ?
O9 W1 O10 82.6(3) . . ?
O1 W1 O17 172.6(3) . . ?
O2 W1 O17 83.8(2) . . ?
O8 W1 O17 72.6(2) . . ?
O9 W1 O17 74.9(2) . . ?
O10 W1 O17 83.6(2) . . ?
O3 W2 O2 102.1(3) . . ?
O3 W2 O12 99.4(3) . . ?
O2 W2 O12 157.6(2) . . ?
O3 W2 O4 101.9(3) . . ?
O2 W2 O4 92.7(3) . . ?
O12 W2 O4 89.1(2) . . ?
O3 W2 O11 100.8(3) . . ?
O2 W2 O11 87.8(3) . . ?
O12 W2 O11 82.0(2) . . ?
O4 W2 O11 156.7(3) . . ?
O3 W2 O18 172.3(3) . . ?
O2 W2 O18 84.2(2) . . ?
O12 W2 O18 75.0(2) . . ?
O4 W2 O18 73.2(2) . . ?
O11 W2 O18 83.7(2) . . ?
O5 W3 O13 100.0(3) . . ?
O5 W3 O6 101.8(3) . . ?
O13 W3 O6 157.2(3) . . ?
O5 W3 O4 101.9(3) . . ?
O13 W3 O4 89.1(3) . . ?
O6 W3 O4 92.7(3) . . ?
O5 W3 O14 101.3(3) . . ?
O13 W3 O14 82.1(3) . . ?
O6 W3 O14 87.3(3) . . ?
O4 W3 O14 156.3(3) . . ?
O5 W3 O18 172.9(3) . . ?
O13 W3 O18 75.1(2) . . ?
O6 W3 O18 83.7(2) . . ?
O4 W3 O18 73.2(2) . . ?
O14 W3 O18 83.3(2) . . ?
O7 W4 O6 100.7(3) . . ?
O7 W4 O16 101.1(3) . . ?
O6 W4 O16 157.1(3) . . ?
O7 W4 O8 102.2(3) . . ?
O6 W4 O8 92.8(3) . . ?
O16 W4 O8 89.4(3) . . ?
```

```
O7 W4 O15 101.2(3) . . ?
O6 W4 O15 86.8(3) . . ?
O16 W4 O15 82.1(2) . . ?
O8 W4 O15 156.2(3) . . ?
O7 W4 O17 173.2(3) . . ?
O6 W4 O17 84.1(2) . . ?
O16 W4 O17 74.7(2) . . ?
O8 W4 O17 72.7(2) . . ?
O15 W4 O17 83.6(2) . . ?
O21 W5 O10 100.2(3) . . ?
O21 W5 O22 99.5(3) . . ?
O10 W5 O22 92.1(3) . . ?
O21 W5 O32 101.0(3) . . ?
O10 W5 O32 89.1(3) . . ?
O22 W5 O32 158.9(3) . . ?
O21 W5 O33 96.5(3) . . ?
O10 W5 O33 163.4(3) . . ?
O22 W5 O33 85.1(3) . . ?
O32 W5 O33 87.8(3) . . ?
O21 W5 O19 171.9(3) . . ?
O10 W5 O19 85.1(2) . . ?
O22 W5 O19 74.0(3) . . ?
O32 W5 O19 85.1(2) . . ?
O33 W5 O19 78.4(2) . . ?
O23 W6 O11 100.5(3) . . ?
O23 W6 O22 98.8(3) . . ?
O11 W6 O22 92.1(3) . . ?
O23 W6 O24 101.2(3) . . ?
O11 W6 O24 89.7(3) . . ?
O22 W6 O24 159.2(3) . . ?
O23 W6 O34 95.5(3) . . ?
O11 W6 O34 164.0(2) . . ?
O22 W6 O34 84.9(3) . . ?
O24 W6 O34 87.6(3) . . ?
O23 W6 O19 171.2(3) . . ?
O11 W6 O19 85.4(2) . . ?
O22 W6 O19 74.3(3) . . ?
O24 W6 O19 85.2(2) . . ?
O34 W6 O19 78.7(2) . . ?
O25 W7 O24 101.1(3) . . ?
O25 W7 O26 102.3(3) . . ?
O24 W7 O26 94.3(3) . . ?
O25 W7 O12 101.0(3) . . ?
O24 W7 O12 87.1(3) . . ?
O26 W7 O12 155.9(2) . . ?
O25 W7 O13 102.1(3) . . ?
O24 W7 O13 155.9(3) . . ?
O26 W7 O13 87.0(3) . . ?
O12 W7 O13 82.2(3) . . ?
O25 W7 O18 174.1(3) . . ?
O24 W7 O18 82.3(2) . . ?
O26 W7 O18 82.1(2) . . ?
O12 W7 O18 74.2(2) . . ?
O13 W7 O18 74.0(2) . . ?
O27 W8 O14 99.6(3) . . ?
O27 W8 O26 100.8(3) . . ?
O14 W8 O26 89.8(2) . . ?
O27 W8 O28 97.8(3) . . ?
O14 W8 O28 92.0(3) . . ?
O26 W8 O28 160.7(3) . . ?
O27 W8 O35 95.6(3) . . ?
O14 W8 O35 164.8(2) . . ?
O26 W8 O35 88.0(2) . . ?
O28 W8 O35 85.2(3) . . ?
O27 W8 O20 170.9(3) . . ?
O14 W8 O20 86.2(2) . . ?
```

```
O26 W8 O20 86.1(2) . . ?
O28 W8 O20 74.8(2) . . ?
O35 W8 O20 78.6(2) . . ?
O29 W9 O15 100.5(3) . . ?
O29 W9 O28 98.8(3) . . ?
O15 W9 O28 91.7(3) . . ?
O29 W9 O30 101.0(3) . . ?
O15 W9 O30 90.0(3) . . ?
O28 W9 O30 159.5(2) . . ?
O29 W9 O36 95.6(3) . . ?
O15 W9 O36 163.9(2) . . ?
O28 W9 O36 85.0(3) . . ?
O30 W9 O36 87.7(2) . . ?
O29 W9 O20 171.3(3) . . ?
O15 W9 O20 85.4(2) . . ?
O28 W9 O20 74.5(2) . . ?
O30 W9 O20 85.3(2) . . ?
O36 W9 O20 78.5(2) . . ?
O31 W10 O30 101.9(3) . . ?
O31 W10 O32 101.5(3) . . ?
O30 W10 O32 94.0(3) . . ?
O31 W10 O16 102.2(3) . . ?
O30 W10 O16 87.3(3) . . ?
O32 W10 O16 155.5(2) . . ?
O31 W10 O9 101.1(3) . . ?
O30 W10 O9 156.3(2) . . ?
O32 W10 O9 87.2(3) . . ?
O16 W10 O9 82.1(3) . . ?
O31 W10 O17 174.0(3) . . ?
O30 W10 O17 82.6(2) . . ?
O32 W10 O17 82.0(2) . . ?
O16 W10 O17 73.9(2) . . ?
O9 W10 O17 74.1(2) . . ?
O37 P1 O36 113.9(4) . . ?
O37 P1 O35 114.3(4) . . ?
O36 P1 O35 109.3(4) . . ?
O37 P1 C1 108.0(6) . . ?
O36 P1 C1 106.0(4) . . ?
O35 P1 C1 104.6(4) . . ?
O38 P2 O33 112.9(4) . . ?
O38 P2 O34 112.0(4) . . ?
O33 P2 O34 110.3(4) . . ?
O38 P2 C4 105.8(5) . . ?
O33 P2 C4 107.4(4) . . ?
O34 P2 C4 108.0(4) . . ?

_diffrn_measured_fraction_theta_max    0.937
_diffrn_reflns_theta_full              30.85
_diffrn_measured_fraction_theta_full   0.937
_refine_diff_density_max    4.095
_refine_diff_density_min   -1.646
_refine_diff_density_rms    0.291
```